$$\mathscr{I}_m\, t^{(2)}(\varepsilon+i0) \propto |\varepsilon|^{n+1} \tag{7}$$

を与える。

以上の議論より $T_K \gg |\varepsilon|$ では，$t^{(2)}(i\varepsilon)$ は first Born term とは全く異なるふるまいをすることが判った。それでは $t^{(3)}(i\varepsilon)$ 以下はどうなるだろうか。それを考えるためには，もう少し formalism を整備する必要があるので別稿にゆずることにする。

文　献

1) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 138 (1965), A1112; Prog. Theor. Phys. 37 (1967), 13.

2) D. R. Hamann, Phys. Rev. 158 (1967), 856.

3) H. Suhl, Phys. Rev. 141 (1966), 483.

4) K. Yosida, Phys. Rev. 147, (1966), 223.

5) 川村　清，　物性研究，　11 (1968), 24.

6) 川村　清，　物性研究，　12 (1969), 1.

7) 川村　清，　物性研究，　10 (1968), 282.

8) H. Ishii and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 38 (1967), 61.

s−d Bound State からの励起 II

東大理　川　村　清

（8月11日受理）

§1 序 論

s−d 相互作用で couple している一個のスピンと，s−電子からなる系を考える。その系は Yosida[1] の提案した bound state にあるとする。（絶対

零度を考える。）すなわち，基底状態を $|0>$ として

$$|0> = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\downarrow}\alpha - \psi_{\uparrow}\beta) \tag{1}$$

ここで α, β は localized spin が上または下を向いている時の状態ベクトルで $\psi_{\uparrow}$ および $\psi_{\downarrow}$ は，上向きまたは下向き spin が一つ多い s−電子の状態ベクトルである。これら4個の状態ベクトルは規格化されている。

（1）で与えられる系に外から電子を1個つけ加える。その電子の散乱は t−matrix で記述出来る。すでに知っているように[2] t−matrix は spin operator の多時間グリーン関数で記述出来る。

$$t(i\epsilon) = t^{(2)}(i\epsilon) + t^{(3)}(i\epsilon) + \cdots \tag{2a}$$

$$t^{(n+1)}(i\epsilon) = -(-J/N)^{n+1}T^n\Sigma_{\{\epsilon\}}\prod_{j=1}^{n}F(i\epsilon_j)\mathscr{S}^{(1)}(\epsilon, \epsilon_1, \cdots, \epsilon_n), \tag{2b}$$

$$\mathscr{S}^{(1)}(\epsilon, \epsilon_1, \cdots, \epsilon_n)$$
$$= \frac{1}{T}\int\cdots\int_0^{\beta}\exp[i(\epsilon-\epsilon_1)\tau_1 + i(\epsilon_1-\epsilon_2)\tau_2 + \cdots + i(\epsilon_n-\epsilon)\tau_{n+1}]$$
$$\times \ll S_1(\tau_1), \quad S_2(\tau_2), \cdots\cdots, S_{n+1}(\tau_{n+1}) \gg. \tag{2c}$$

ここで

$$S_1 = (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{\alpha\alpha_1}, \quad S_{n+1} = (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{\alpha_n\alpha},$$
$$S_k = (\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{\alpha_{k-1}\alpha_k}. \tag{3}$$

前稿（以後Iと書く）において[3] われわれは（2c）の spin Green 関数の時間依存性が T，$|\epsilon| \lesssim T_K$ で重要であることを見た。その様な場合，単に運動方程式を正直に計算して行くという方法はあまり得策ではない。われわれは本稿において，新しい計算法を提案する。

§2 Decoupling of Spin Green Function.

Spin Green function は（n+1）個の時間に依存した spin operator の T−product を（1）の基底状態での期待値で計算して得られる。（n＋1）

個の時刻が $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \cdots > \tau_{n+1}$ の順序の場合上記の期待値は

$$
\begin{aligned}
&< 0|S_1(\tau_1)\,S_2(\tau_2) \cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1})|0> \\
&+ \sum_{m=1}^{n} < 0|S_1(\tau_1) \cdots\cdots S_m(\tau_m)|0> < 0|S_{m+1}(\tau_{m+1}) \cdots\cdots \\
&\qquad\qquad S_{n+1}(\tau_{n+1})|0> + \cdots\cdots
\end{aligned}
\tag{4}
$$

ここで $<0| \cdots\cdots |0>$ と書いた時，中間状態には基底状態は含まれないものとする。

（4）の"decoupling"は可能なあらゆるやり方で行なわなければならない。（4）の第２項の和の一項を考えよう。$\tau_1, \cdots\cdots, \tau_m$ の時刻の順序が入れ替ったり $\tau_{m+1}, \cdots\cdots, \tau_{n+1}$ の時刻の順序が入れ替ったものの寄与は $S_1(\tau_1) \cdots\cdots S_m(\tau_m)$ または $S_{m+1}(\tau_{m+1}) \cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1})$ の T－product を導入すればよい。また $\tau_j (1 \leq j \leq m)$ と $\tau_k (m+1 \leq k \leq n+1,)$ の順序の入れ替ったものは，（4）の $S_j(\tau_j)$ と $S_k(\tau_k)$ が入れ替ったもので書ける。したがって基底状態での期待値２つの積で書ける項は次のような規則で作られる。まず $S_1, \cdots\cdots, S_{n+1}$ の（n+1）個の operator をあらゆる可能な方法で２組に分ける。各組みの operator を suffix の順に並べておいて T－operator を作用させ，各組毎に基底状態での期待値を計算する。３つ以上に decouple する方法も同様である。たとえば５つの spin operator からなる Green 関数の decoupling は次のようになる。

$$
\begin{aligned}
&< 0|T(S_1S_2S_3S_4S_5)|0> \\
&+ < 0|T(S_1S_2S_3)|0> < 0|T(S_4S_5)|0> \\
&+ < 0|T(S_1S_2S_4)|0> < 0|T(S_3S_5)|0> \\
&+ \cdots\cdots \\
&+ < 0|T(S_3S_4S_5)|0> < 0|T(S_1S_2)|0>.
\end{aligned}
\tag{5}
$$

§3 triplet state の励起 operator

したがってわれわれの計算すべきものは2つ以上の spin operator の T-product の基底状態の平均値のうち，中間状態に基底状態を含まないものである。再び $\tau_1 > \tau_2 > \cdots\cdots > \tau_{n+1}$ とする。$S_{n+1}|0>$ は $|t_m>$ に比例する。ここで

$$|t_1> = \psi_\uparrow \alpha, \quad |t_0> = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\uparrow \beta + \psi_\downarrow \alpha), \quad |t_{-1}> = \psi_\downarrow \beta. \tag{6}$$

この triplet state は Hamiltonian の固有状態ではないから，

$$S_{n+1}|0> = C_m|t_m> = \Sigma_n C_m <n|t_m> |n>, \tag{7}$$

ここで $H|n> = E_n|n>$．あきらかに $|n>$ は triplet state で3重に縮退している。以上のことから，次の式を得る。

$$<0|S_1(\tau_1)S_2(\tau_2)\cdots\cdots,S_{n+1}(\tau_{n+1})|0>$$
$$= \Sigma_\nu \exp[-(\tau_1-\tau_{n+1})E_\nu]$$
$$<0|S_1|t>|<t|\nu>|^2<\nu|S_2\cdots\cdots S_n|\nu><t|S_{n+1}|0>. \tag{8}$$

ここで spin operator は triplet state ではさむと，同じエネルギーに属する state の間でのみ値をもつことを使った。

(8) の左辺において T-product がある時は右辺でそれに相当する変更を行なえばよい。それを数学的に記述すると Σ_ν の中に

$$\Sigma_{i\neq j} \exp[-(\tau_i-\tau_j)E_\nu]\theta(\tau_i-\{\tau\})\theta(\{\tau\}-\tau_j)$$
$$\times <0|S_i|t><t|S_j|0>|<t|\nu>|^2<\nu|T(S_1\cdots\cdots S_{n+1})|\nu> \tag{9}$$

が来る。ここで $\theta(\tau_i-\{\tau\})$ は τ_i が残りの全ての τ_k より大きい時1で，そうでない時は消えるという意味である。$T(S_1\cdots\cdots S_{n+1})$ は S_i, S_j を除く $(n-1)$ 個の spin operator を時刻の順序に並べることを意味する。

spin operator が triplet state にはさまれるか否かの二つの場合で

書き方を変えた方が便利である。まず，次のことに注意しよう。

$$\begin{cases} S_{+}|0\rangle = \dfrac{-1}{\sqrt{2}}|t_1\rangle, & S_0|0\rangle = \dfrac{1}{2}|t_0\rangle, \\ S_{-}|0\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}|t_{-1}\rangle & \end{cases} \tag{10}$$

そこで Spin operator が singlet state に作用する場合に限り

$$S_z = (b_0^{+} + b_0), \qquad S_{+} = (b_1^{+} + b_{-1}),$$

$$S_{-} = (b_{-1}^{+} + b_1) \tag{11}$$

とおくことにする。もしも S が出て来たら，以下では，triplet state でのみはさまれるものと約束する。（10）を参照すると，（11）は次の条件のもとに成りたつ。

$$b_0^{+}|0\rangle = \frac{1}{2}|t_0\rangle, \qquad b_1^{+}|0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|t_1\rangle,$$

$$b_{-1}^{+}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|t_{-1}\rangle, \qquad \langle 0|b_0 = \frac{1}{2}\langle t_0|, \tag{12}$$

$$\langle 0|b_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle t_{-1}| \qquad \langle 0|b_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\langle t_1|$$

更に

$$\begin{cases} b(\tau) = e^{H\tau}\, b\, e^{-H\tau} = \exp(-E_\nu\tau)\, b, \\ b^{+}(\tau) = e^{H\tau}\, b^{+}\, e^{-H\tau} = \exp(E_\nu\tau)\, b^{+}. \end{cases} \tag{13}$$

（b or b^{+} はしたがって ν の関数だが suffix は省略する。故に新たに定義しなおした S−operator，b−operator を使って，（9）の Green 関数は次のように書ける。

$$\Sigma_{i\neq j} \langle\!\langle S_1(\tau_1),\ S_2(\tau_2),\ \cdots\cdots,\ (b_i^{+} + b_i)(\tau_i),\ \cdots\cdots,$$
$$(b_j^{+} + b_j)(\tau_j),\ S_{j+1}(\tau_{j+1}),\ \cdots\cdots,\ S_{n+1}(\tau_{n+1}) \rangle\!\rangle \tag{14}$$

実際，$b_i(\tau_i)$，$b_j^+(\tau_j)$ がそれぞれ左端，右端に来た時のみこの関数の値が残るから，まず（9）の θ・function が出る。そのような場合，残りの τ－values は任意で（9）の T－product で記述出来る。更に

$$T(S_1(\tau_1)\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1}))\, b_j^+(\tau_j)|0\rangle$$
$$=\Sigma_\nu \exp(E_\nu \tau_j)\, T(S_1(\tau_1)\cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1}))|\nu\rangle$$
$$\langle\nu|t\rangle\langle t|b_j^+|0\rangle$$

が成りたつから，（10）と（12）を比較して，（14）と（9）の同等性が成りたつ。

以上をまとめれば（n＋1）－時間 spin Green 関数は次のように書ける。（i）まず（4）のような decoupling が行なわれる。（ii）各要素は（14）のように書ける。（但し，（14）の suffix は一応1から（n＋1）までつけたが，decouple した時の各要素は前の議論で判るように途中の数が抜けている。したがって，必ずしも（14）の各 S_j は（3）で定義出来ない。勿論（4）の第一項のみは（3）の S_j を使って（14）で与えられる。

§4　S－operator の変換関係

S－operator は triplet state にのみ作用するということから，普通の交換関係

$$\mathbf{S}\times\mathbf{S}=i\mathbf{S}$$

は成りたたない。（6）の $|t_m\rangle$ の定義式中の ψ－関数は基底状態を（1）のように書いた時の ψ－関数であるが，一般に全ての triplet state は全て同じ形をしている。異なるのは ψ の explicit な形のみであるが，S－operator は ψ－関数に作用しないから，ψ についての具体的な形は知らなくてもよい。したがって，しばらくは（6）の形を頭にうかべておけばよい。$\langle t_{m'}|S|t_m\rangle \equiv S_{m',m}$ と記すと，（6）から容易に

$$(S_z)_{ik} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix},$$

$$(S_+)_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$(S_-)_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (15)$$

この結果を使って，たとえば

$$[S_+, S_-]|t_1> = S_+|t_m>(S_-)_{m1} - S_-|t_m>(S_+)_{m1}$$
$$= \frac{1}{2}|t_1>$$
$$S_z|t_1> = \frac{1}{2}|t_1>$$

したがって，

$$[S_+, S_-] = S_z$$

を得る。この式の右辺は普通の交換関係を使った場合の半分であるから，われわれの結論は

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = \frac{1}{2} i\mathbf{S}, \qquad (16)$$

で与えられる。

運動方程式を使う時必要な交換関係は spin operator と Pauli matrix の内積の間の交換関係である。(16) を使えば容易に

$$[\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\cdot\mathbf{S}, \boldsymbol{\sigma}_{\beta\gamma}\cdot\mathbf{S}] = -\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\gamma}\cdot\mathbf{S} \qquad (17)$$

が成りたつことが判る。

§5 b-operator の交換関係

b と b^+ の間の交換関係は b-operator の定義式から与えられる。たとえば (12) から

$$[b_0, b_0^+]|0> = \frac{1}{2} b_0 | t_0 > = \frac{1}{4} |0>$$

故に

$$[b_0, b_0^+] = \frac{1}{4} \tag{18}$$

同様に

$$[b_1, b_1^+] = [b_{-1}, b_{-1}^+] = \frac{1}{2}$$

$\mathbf{S} \cdot \sigma_{\alpha\beta}$ を b-operator でおきかえると

$$\mathbf{1} \cdot \sigma_{\alpha\beta} (b_{\alpha-\beta} + b_{\beta-\alpha}^+)$$

になる。このように Pauli matrix がかかった場合の交換関係は，次のようになる。

$$[\mathbf{1} \cdot \sigma_{\alpha\beta}\, b_{\alpha-\beta},\ \mathbf{1} \cdot \sigma_{\beta\gamma}\, b_{\gamma-\beta}^+] = \frac{3}{4} \delta_{\gamma\alpha} \tag{19}$$

§6 b-operator と S-operator の交換関係

もしも

$$<0|[b, S]|t_m> = C_{bs} <0|b|t_m>$$

が成りたつとすると，これを

$$[b, S] = C_{bs}\, b$$

と書いて交換関係を定義しよう。そうすると b, b^+ 及び S の matrix element は既に判っているから，それを使って次の表を得る。

[b, S]	b_1	b_0	b_{-1}
S_+	$-b_0$	$\frac{1}{2}b_{-1}$	0
S_z	$\frac{1}{2}b_1$	0	$-\frac{1}{2}b_{-1}$
S_-	0	$-\frac{1}{2}b_1$	b_0

[b^+ S]	b_1^+	b_0^+	b_{-1}^+
S_+	0	$\frac{1}{2}b_1^+$	$-b_0^+$
S_z	$-\frac{1}{2}b_1^+$	0	$\frac{1}{2}b_{-1}^+$
S_-	b_0^+	$-\frac{1}{2}b_{-1}^+$	0

b及び**S**に Pauli matrix がかかると次のようになる。

$$[\mathbf{1}\cdot\sigma_{\alpha\beta}b_{\alpha-\beta},(\mathbf{S}\cdot\sigma_{\beta\gamma})]=-\mathbf{1}\cdot\sigma_{\alpha\gamma}(b_{\alpha-\gamma}+b^+_{\gamma-\alpha}) \quad (20)$$

§7　運動方程式

最後に spin Green 関数の従う運動方程式を調べる。その際（4）の第2項の "decoupling" において，各要素は C－number で互いに独立であることにしよう。そうすれば各要素を別々に計算すればよいことが判る。すなわち（4）の第一項の計算が出来ればよい。その第一項は b－operator を一つと b^+－operator を一つふくんでいる。たとえば次のような項を考えればよい。

$$\begin{aligned}&\ll S_1(\tau_1),\ S_2(\tau_2),\ \cdots\cdots,\ b_i(\tau_i),\ \cdots\cdots,\ b_j^+(\tau_j),\\&\quad\cdots\cdots,\ S_{n+1}(\tau_{n+1})\gg\\&=-\langle 0|b_i|t_m\rangle\langle t_m|\nu_m\rangle\langle\nu_m|T(S_1(\tau_1),\\&\quad\cdots\cdots,\ S_{n+1}(\tau_{n+1})|\nu_{m'}\rangle\\&\quad\langle\nu_{m'}|t_{m'}\rangle\langle t_{m'}|b_j^+|0\rangle\exp[-(E_\nu\tau_i-E_\nu\tau_j)]\\&\quad\times\theta(\tau_i-\{\tau\})\,\theta(\{\tau\}-\tau_j)\,.\end{aligned}\quad (21)$$

（簡単の為に m，m′，ν_m，$\nu_{m'}$ についての和はおとした）。両辺を b_j^+ の argument の τ_j で微分すると，まず E_ν に比例する項が出る。その他に θ 一関数の微分の項から $\delta(\tau_j-\tau_k)$（k ≠ i, j）が出る。その係数には τ_k

が S−operator の argument の中で一番小さいものとして

$$\Sigma_{m'} \langle \nu_m | T(S_1(\tau_1) \cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1}))\, S_k(\tau_k) | \nu_{m'} \rangle$$

$$\langle \nu_{m'} | t_{m'} \rangle \langle t_{m'} | b_j^+ | 0 \rangle \exp(E_\nu \tau_k)$$

$$= -\Sigma_{m'} \langle \nu_m | T(S_1(\tau_1) \cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1})) | \nu_{m'} \rangle$$

$$\langle \nu_{m'} | [b_j^+,\ S_k] | 0 \rangle \times \exp(E_\nu \tau_k)$$

という項がある。このことから（21）の右辺（中間状態の和の中味）は普通の Green 関数の運動方程式と同じものに従うことが判る。いいかえれば（21）の左辺の Green 関数は次のような運動方程式の解に $|\langle t|\nu\rangle|^2$ をかけて ν について加えればよい。

$$(d/d\tau_j) \langle\langle S_1(\tau_1),\ S_2(\tau_2), \cdots\cdots, b_i(\tau_i), \cdots\cdots b_j^+(\tau_j) \cdots\cdots$$

$$S_{n+1}(\tau_{n+1}) \rangle\rangle$$

$$= E_\nu \langle\langle S_1(\tau_1), \cdots\cdots, b_i(\tau_i), \cdots\cdots, b_j^+(\tau_j) \cdots\cdots S_{n+1}(\tau_{n+1}) \rangle\rangle$$

$$+ \delta(\tau_j - \tau_{n+1}) \langle\langle \cdots\cdots, S_n(\tau_n), [b_j^+, S_{n+1}](\tau_{n+1}) \rangle\rangle$$

$$+ \delta(\tau_j - \tau_n) \langle\langle \cdots\cdots, S_{n-1}(\tau_{n-1}), [b_j^+, S_n](\tau_n), S_{n+1}(\tau_{n+1}) \rangle\rangle$$

$$+ \cdots\cdots$$

$$+ \delta(\tau_j - \tau_1) \langle\langle [b_j^+, S_1](\tau_1),\ S_2(\tau_2), \cdots\cdots \rangle\rangle \qquad (22)$$

（2c）のような Fourier 変換を行なうと，（22）で次のおきかえをした式になる。

$$(d/d\tau_j - E_\nu) \rightarrow -i(\varepsilon_{j-1} - \varepsilon_j) - E_\nu$$

$$\delta(\tau_j - \tau_k) \langle\langle \cdots\cdots, [b_j^+, S_k](\tau_k), \cdots\cdots \rangle\rangle$$

$$\rightarrow \langle\langle S_1(\varepsilon - \varepsilon_1), \cdots\cdots, b_i(\varepsilon_{i-1} - \varepsilon_i), \cdots\cdots$$

$$[b_j^+, S_k](\varepsilon_{j-1}-\varepsilon_j+\varepsilon_{k-1}-\varepsilon_k), \cdots\cdots S_{n+1}(\varepsilon_n-\varepsilon)\gg. \tag{23}$$

§8 討　　論

これまでわれわれは Yosida[1] の singlet ground state にある target に電子がぶつかった時の t−matrix を計算するための formulation を行なった。I で見たように，$T<T_K$ においては，Hamiltonian が spin operator と交換しない為に target state の縮退がとれることが重要になる。縮退がとれて ground state は singlet state になったとすれば，それに電子がぶつかると triplet state になる。この過程を記述するのが，b^+−operator である。その triplet state の電子は再び singlet state になるか，あるいは他の triplet state に遷移する。前者を記述するのが b であり後者を記述するのが S−operator である。

われわれの公式の長所は，$[H, \vec{S}]$ という commutator が E_ν を使って簡単に書けることである（(22) の右辺第１項）。一方このままでは $|\langle t_m|\nu_m\rangle|^2$ という量が未定の parameter として入っていることが欠点である。これを決める為には dynamical な spin 帯磁率を計算しなくてはならない。この formalism の応用は別稿にゆずりたい。

文　　献

1） K. Yosida, Phys. Rev. **147**, 223 (1966)

2） 川村　清，物性研究 10 (1968), 282.

3） 川村　清、物性研究　本号